

## RAČUNALNA HOMOGENIZACIJA DRUGOG REDA UZ PRIMJENU GRADIJENTNE TEORIJE NA MIKRORAZINI

Lesičar, T., Tonković, Z., Sorić, J.

**Sažetak:** U današnje vrijeme, za dovoljno precizno opisivanje ponašanja heterogenih materijala, nužno je uzeti u obzir mikrostrukturne pojave u materijalu. Pritom je pokazano da višerazinska analiza uz primjenu homogenizacije daje najbolje rezultate. Računalna homogenizacija drugog reda zahtijeva zadovoljavanje  $C^1$  kontinuiteta na makrorazini, dok se na mikrostrukтури primjenjuje klasični pristup mehanike kontinuuma ( $C^1$ - $C^0$  homogenizacija). Nažalost zbog primjena različitih pristupa na makro- i mikrorazini, dolazi do nekonzistentnosti. U radu je izveden algoritam višerazinskog modeliranja heterogenih materijala uz primjenu računalne homogenizacije drugog reda, pri čemu se na mikrorazini primjenjuje gradijentna deformacijska teorija ( $C^1$ - $C^1$  homogenizacija). Algoritam je izveden uz pretpostavku malih deformacija i linearno-elastičnog ponašanja materijala prema Aifantisovoj gradijentnoj teoriji. Izveden je postupak homogenizacije varijabli makrorazine i gradijentni rubni uvjeti na RVEu. Istražen je utjecaj nelokalnosti u  $C^1$ - $C^1$  pristupu. Izvedeni numerički algoritmi ugrađeni su u računalni paket ABAQUS. Točnost algoritma verificirana je na problemu smičnog sloja, gdje su rezultati uspoređeni s rezultatima dobivenim  $C^1$ - $C^0$  homogenizacijom.

**Ključne riječi:** Heterogeni materijali,  $C^1$  konačni element,  $C^1$  kontinuitet na mikrorazini, računalna homogenizacija drugog reda, gradijentni poopćeni rubni uvjeti periodičnosti.

### 1 UVOD

Svi materijali se mogu smatrati heterogenima, ukoliko se razmatra dovoljno mali djelić materijala. Poznato je da se lokalnim pristupom mehanike kontinuuma materijali tretiraju kao homogeni te na taj način nije moguće obuhvatiti mikrostrukturne pojave koje se odvijaju u materijalu. Za precizno opisivanje mikrostrukturnih promjena nužan je višerazinski pristup, koji uzima u obzir ponašanje materijala na različitim fizikalnim razinama. Stoga je prije nekoliko godina predložena metoda računalne homogenizacije drugog reda [3, 6], kod koje se na makrorazini primjenjuje nelokalna teorija kontinuuma, tj. zadovoljen je  $C^1$  kontinuitet. Pri tome, na mikrorazini, reprezentativni volumenski element (RVE) je još uvijek opisan primjenom klasičnog kontinuuma ( $C^1$ - $C^0$  homogenizacija). Zahvaljujući gradijentima višeg reda na makrorazini, homogenizacija drugog reda može opisati složene probleme u kojima se javljaju značajniji gradijenti. Uz to, primjenom nelokalne teorije na makrorazini moguće je i opisati nelokalno ponašanje, pri čemu je veličina RVE-a utjecajni parametar. Unatoč prednostima homogenizacije drugog reda, prijenos varijabli između različitih teorija kontinuuma ( $C^1$ - $C^0$ ) uzrokuje nekonzistentnosti u matematičkom modelu. Prva nekonzistentnost se javlja u uprosječavanju gradijenata višeg reda na makrorazini, koji ne mogu biti prikazani kao volumenski prosjek gradijenata višeg reda na RVE-u. Zatim, primjenom Hill-Mandelovog energijskog uvjeta sekundarno naprezanje na mikrostrukтури se opisuje modificiranom relacijom. Osim toga, mikrofluktuacije u

kutevima RVE-a kod primjene rubnih uvjeta periodičnosti su ukinute, što posljedično izaziva nefizikalne koncentracije deformacija i naprezanja.

Stoga je u ovom radu izveden novi algoritam višerazinske analize koji primjenjuje homogenizaciju drugog reda i zadovoljava  $C^1$  kontinuitet na mikrorazini [5]. Mikrostruktura je opisana Aifantisovom teorijom gradijentne elastičnosti, uz pretpostavku malih deformacija i linearno elastičnog ponašanja. Za novu shemu višerazinske analize izveden je postupak prijenosa varijabli između razina. Zahvaljujući nelokalnoj teoriji kontinuuma na RVE-u, u prijenosu između različitih razina sve veličine makrorazine mogu biti prikazane kao konzistentni volumenski prosjek konjugirane veličine na mikrorazini. Uz to, izvedeni su novi gradijentni poopćeni rubni uvjeti periodičnosti. Svi izvedeni algoritmi ugrađeni su u programski paket Abaqus [1].

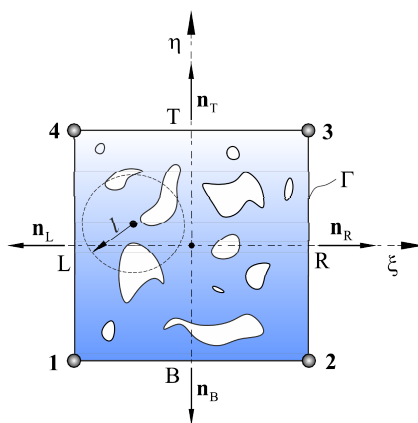
## 2 $C^1$ - $C^1$ RAČUNALNA HOMOGENIZACIJA DRUGOG REDA

### 2.1 Prijenos varijabli s makrorazine na mikrorazinu

Kao što je već spomenuto, u mikro-makro postupku koji je izveden,  $C^1$  kontinuitet je zadovoljen na obje razine, pri čemu se za rješavanje problema rubnih vrijednosti primjenjuje metoda konačnih elemenata. Za diskretizaciju modela na makrorazini, kao i RVE-a koristi se dvodimenzijski trokutni konačni element s 3 čvora, izveden i verificiran u [4]. U daljnjem tekstu, sve veličine vezane u makrorazinu označene su indeksom “M”, dok su veličine mikrorazine označene indeksom “m”. Kao što je poznato, pomaci u čvorovima na rubovima RVE-a definiranog prema slici 1 ovise o gradijentima makrorazine, a njihova veza je opisana razvojem u Taylorov red. Za slučaj kada se na makrorazini primjenjuje Aifantisova teorija pomaci rubnih čvorova RVE-a opisani su izrazom

$$\mathbf{u}_m = \boldsymbol{\varepsilon}_M \mathbf{x} + \frac{1}{2} [\mathbf{x} (\nabla \boldsymbol{\varepsilon}_M) \mathbf{x}] + \mathbf{r}. \quad (1)$$

U jednadžbi (1),  $\mathbf{x}$  je prostorna koordinata na mikrorazini,  $\boldsymbol{\varepsilon}_M$  je tenzor deformacija na makrorazini, a  $\mathbf{r}$  predstavlja polje mikrofluktuacija.



Sl. 1. Reprezentativni volumenski element

Na temelju izraza (1), lako je dobiti volumenski prosjek deformacija na mikrorazini

$$\frac{1}{V} \int_V (\nabla_m \mathbf{u}_m) dV = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\varepsilon}_m dV = \boldsymbol{\varepsilon}_M + \frac{1}{V} \int_V (\nabla \boldsymbol{\varepsilon}_M \mathbf{x}) dV + \frac{1}{V} \int_V (\nabla_m \mathbf{r}) dV, \quad (2)$$

i volumenski prosjek sekundarnih deformacija

$$\frac{1}{V} \int_V (\nabla_m \boldsymbol{\varepsilon}_m) dV = \nabla \boldsymbol{\varepsilon}_M + \frac{1}{V} \int_V [\nabla_m (\nabla_m \mathbf{r})] dV. \quad (3)$$

Da bi zadovoljili vezu između deformacija na makrorazini i volumenskog prosjeka deformacija na mikrorazini, očito je da u izrazima (2) i (3) integralni članovi vezani uz mikrofluktuacije moraju iščeznuti

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_V (\nabla_m \mathbf{r}) dV &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \mathbf{r}) d\Gamma = \mathbf{0}, \\ \frac{1}{V} \int_V [\nabla_m (\nabla_m \mathbf{r})] dV &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma} [\mathbf{n} (\nabla_m \mathbf{r})] d\Gamma = \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (4)$$

gdje  $\Gamma$  označava vanjski rub RVE-a. Za primjenu izraza (1) u metodi konačnih elemenata, potrebno je uvesti koordinatne matrice  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{H}_1$  i  $\mathbf{H}_2$ , koje zamjenjuju prostornu koordinatu RVE-a i vezane su uz deformaciju i gradijente deformacije u smjerovima  $x$  i  $y$  osi. Na taj način, izraz (1) prelazi u

$$\mathbf{u} = \mathbf{D}^T \boldsymbol{\varepsilon}_M + (\mathbf{H}_1^T)(\boldsymbol{\varepsilon}_{,1})_M + (\mathbf{H}_2^T)(\boldsymbol{\varepsilon}_{,2})_M, \quad (5)$$

pri čemu su mikrofluktuacije ukinute. U izrazu (5),  $\mathbf{u}$  predstavlja vektor stupnjeva slobode konačnog elementa. Pošto se u  $C^1$  elementu uz pomake kao stupnjevi slobode javljaju i prve i druge derivacije pomaka, za slučaj gradijentnih rubnih uvjeta pomaka svi stupnjevi slobode se propisuju po rubovima RVE-a na temelju izraza (5). Za primjenu gradijentnih rubnih uvjeta periodičnosti stupnjevi slobode kutnih čvorova RVE-a definiranih na slici 1 određuju se prema izrazu (5), dok su ostali rubni čvorovi vezani jednadžbama periodičnosti. Za definiranje jednadžbi periodičnosti, potrebno je zadovoljiti uvjete periodičnosti mikrofluktuacija  $\mathbf{r}_R = \mathbf{r}_L$  i  $\mathbf{r}_T = \mathbf{r}_B$  pomoću izraza (1).

Daljnijim uvrštavanjem koordinatnih matrica slijede jednadžbe periodičnosti

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_R - \mathbf{u}_L &= (\mathbf{D}_R^T - \mathbf{D}_L^T) \boldsymbol{\varepsilon}_M + [(\mathbf{H}_1^T)_R - (\mathbf{H}_1^T)_L](\boldsymbol{\varepsilon}_{,1})_M + [(\mathbf{H}_2^T)_R - (\mathbf{H}_2^T)_L](\boldsymbol{\varepsilon}_{,2})_M, \\ \mathbf{u}_T - \mathbf{u}_B &= (\mathbf{D}_T^T - \mathbf{D}_B^T) \boldsymbol{\varepsilon}_M + [(\mathbf{H}_1^T)_T - (\mathbf{H}_1^T)_B](\boldsymbol{\varepsilon}_{,1})_M + [(\mathbf{H}_2^T)_T - (\mathbf{H}_2^T)_B](\boldsymbol{\varepsilon}_{,2})_M. \end{aligned} \quad (6)$$

## 2.2 Prijenos varijabli s mikrorazine na makrorazinu

Za prijenos naprezanja s RVE-a na makrorazinu Hill-Mandelov energijski uvjet glasi

$$\frac{1}{V} \int_V [\boldsymbol{\sigma}_m : \delta \boldsymbol{\varepsilon}_m + \boldsymbol{\mu}_m : (\nabla_m \delta \boldsymbol{\varepsilon}_m)] dV = \boldsymbol{\sigma}_M : \delta \boldsymbol{\varepsilon}_M + \boldsymbol{\mu}_M : (\nabla \delta \boldsymbol{\varepsilon}_M). \quad (7)$$

Kao što je vidljivo u izrazu (7), varijacija rada obje razine je prikazana preko istih veličina, što nije bilo moguće u  $C^1$ - $C^0$  homogenizaciji. Uvrštavanjem gradijenata pomaka na mikrorazini prema izrazu (1) u Hill-Mandelov uvjet (7) slijede homogenizirana naprezanja na makrorazini

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_M &= \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\sigma}_m dV, \\ \boldsymbol{\mu}_M &= \frac{1}{V} \int_V (\boldsymbol{\mu}_m + \boldsymbol{\sigma}_m \mathbf{x}) dV.\end{aligned}\quad (8)$$

Za dobivanje konstitutivnih relacija na makrorazini pretpostavljene su poopćene Aifantisove konstitutivne relacije

$$\begin{aligned}\Delta \boldsymbol{\sigma}_M &= \mathbf{C}_{\sigma\epsilon} : \Delta \boldsymbol{\epsilon}_M + \mathbf{C}_{\sigma\epsilon_{x_1}} : \Delta (\boldsymbol{\epsilon}_{x_1})_M + \mathbf{C}_{\sigma\epsilon_{x_2}} : \Delta (\boldsymbol{\epsilon}_{x_2})_M, \\ \Delta (\boldsymbol{\mu}_{x_1})_M &= \mathbf{C}_{\mu_{x_1}\epsilon} : \Delta \boldsymbol{\epsilon}_M + \mathbf{C}_{\mu_{x_1}\epsilon_{x_1}} : \Delta (\boldsymbol{\epsilon}_{x_1})_M + \mathbf{C}_{\mu_{x_1}\epsilon_{x_2}} : \Delta (\boldsymbol{\epsilon}_{x_2})_M, \\ \Delta (\boldsymbol{\mu}_{x_2})_M &= \mathbf{C}_{\mu_{x_2}\epsilon} : \Delta \boldsymbol{\epsilon}_M + \mathbf{C}_{\mu_{x_2}\epsilon_{x_1}} : \Delta (\boldsymbol{\epsilon}_{x_1})_M + \mathbf{C}_{\mu_{x_2}\epsilon_{x_2}} : \Delta (\boldsymbol{\epsilon}_{x_2})_M.\end{aligned}\quad (9)$$

Na temelju izraza (9), vidljivo je da na makrorazini treba odrediti 9 konstitutivnih matrica. Konstitutivne matrice je moguće izvesti na način prikazan u [6], gdje su matrice prikazane pomoću kondenzirane krutosti RVE-a  $\tilde{\mathbf{K}}_{bb}$  i koordinatnih matrica

$$\begin{aligned}\mathbf{C}_{\sigma\epsilon} &= \frac{1}{V} \mathbf{D} \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{D}^T, \mathbf{C}_{\sigma\epsilon_{x_1}} = \frac{1}{V} \mathbf{D} \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{H}_1^T, \mathbf{C}_{\sigma\epsilon_{x_2}} = \frac{1}{V} \mathbf{D} \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{H}_2^T, \\ \mathbf{C}_{\mu_{x_1}\epsilon} &= \frac{1}{V} \mathbf{H}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{D}^T, \mathbf{C}_{\mu_{x_1}\epsilon_{x_1}} = \frac{1}{V} \mathbf{H}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{H}_1^T, \mathbf{C}_{\mu_{x_1}\epsilon_{x_2}} = \frac{1}{V} \mathbf{H}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{H}_2^T, \\ \mathbf{C}_{\mu_{x_2}\epsilon} &= \frac{1}{V} \mathbf{H}_2 \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{D}^T, \mathbf{C}_{\mu_{x_2}\epsilon_{x_1}} = \frac{1}{V} \mathbf{H}_2 \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{H}_1^T, \mathbf{C}_{\mu_{x_2}\epsilon_{x_2}} = \frac{1}{V} \mathbf{H}_2 \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{H}_2^T.\end{aligned}\quad (10)$$

### 2.3 Opisivanje utjecaja nelokalnosti u $C^1$ - $C^1$ homogenizaciji

Nakon definiranja veze između dviju razina potrebno je razmotriti nelokalne efekte koji je očituju na RVE-u i njihov utjecaj na mehaničko ponašanje makrostrukture. Iz  $C^1$ - $C^0$  homogenizacije je poznato da je veličina RVE-a parametar nelokalnosti. No u  $C^1$ - $C^1$  homogenizaciji konstitutivni model na mikrorazini sadrži Aifantisov parametar nelokalnosti  $l^2$ , uz veličinu RVE-a. Stoga je potrebno odrediti vezu između parametra  $l^2$  i veličine RVE-a, te njihov međusobni utjecaj svesti na jedinstveni „efektivni“ parametar nelokalnosti. U  $C^1$ - $C^0$  homogenizaciji poznata je veza Aifantisovog parametra  $l^2$  i veličine RVE-a ( $L$ ), koja je izvedena u [2] i glasi

$$l^2 = \frac{L^2}{12}.\quad (11)$$

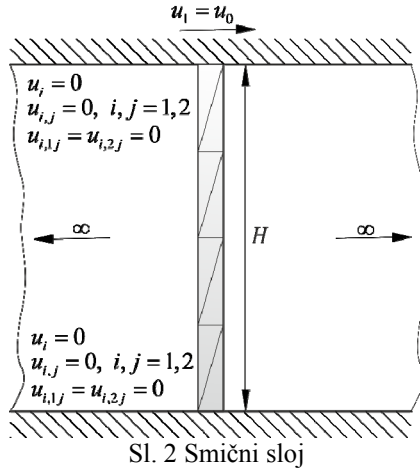
Međutim, izraz (11) ne rješava problem kada se obje veličine javljaju u istom modelu. Primjenom  $C^1$  homogenizacije na jednostavnom analitičkom primjeru moguće je pokazati da je „efektivni“ parametar nelokalnosti u  $C^1$ - $C^1$  homogenizaciji definiran kao

$$l_{\text{eff}}^2 = l^2 + \frac{L^2}{12}.\quad (12)$$

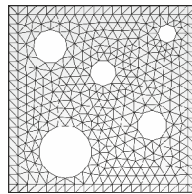
## 3 NUMERIČKI PRIMJER

Izvedeni postupak  $C^1$  homogenizacije testiran je na problemu smičnog sloja, a dobiveni rezultati su uspoređeni s rezultatima  $C^1$ - $C^0$  homogenizacije [6] pomoću izraza (12). Makromodel visine  $H = 10$  mm s odgovarajućim rubnim uvjetima je prikazan na slici

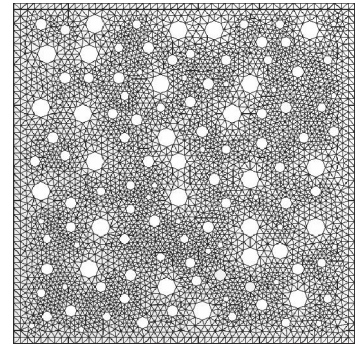
2, pri čemu ja na gornje uklještenje nametnut pomak  $u_0 = 0,005 \text{ mm}$ . U primjeru je korišten akademski primjer linearno elastičnog čelika s 13% slučajno raspoređenih poroznosti, kao što je prikazano na slikama 3 i 4. Duljine stranica RVE-a iznose  $L = 0,2 \text{ mm}$  (Sl. 3) i  $L = 1 \text{ mm}$  (Sl. 4). Svojstva matrice materijala su  $E = 210 \text{ GPa}$  i  $\nu = 0,3$ . Na RVE-u su korišteni gradijentni rubni uvjeti pomaka i periodičnosti.



Sl. 2 Smični sloj

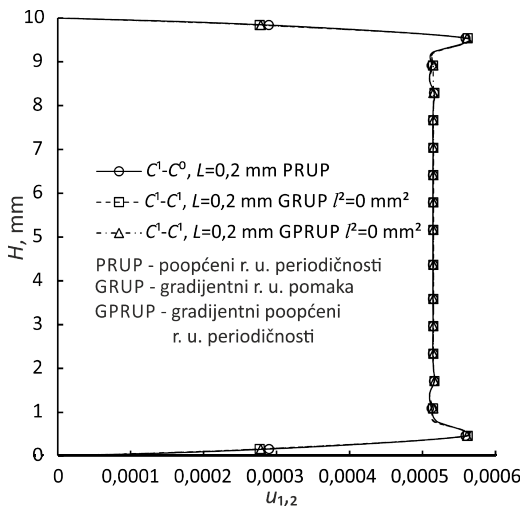


Sl. 3 RVE,  $L = 0,2 \text{ mm}$

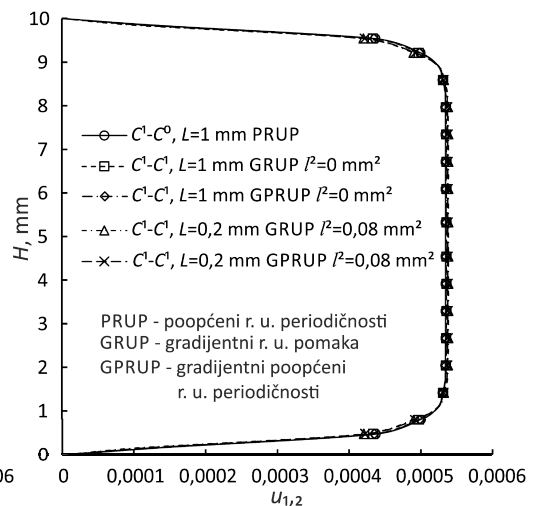


Sl. 4 RVE,  $L = 1 \text{ mm}$

U prvom slučaju odabrani parametri u  $C^1$ - $C^1$  homogenizaciji su  $l^2 = 0$  i  $L = 0,2 \text{ mm}$ . Da bi rezultati bili usporedivi prema izrazima (11) i (12), u  $C^1$ - $C^0$  pristupu je korišten RVE iste veličine. U drugom slučaju, u  $C^1$ - $C^0$  shemi je odabran RVE veličine  $L = 1 \text{ mm}$ . Za usporedbu rezultata  $C^1$ - $C^1$  pristupom, prvo je odabran RVE iste veličine ( $L = 1 \text{ mm}$ ) uz  $l^2 = 0$ . Nakon toga, odabran je RVE veličine  $L = 0,2 \text{ mm}$ , pri čemu je razlika veličine RVE-a kompenzirana odgovarajućim iznosom Aifantisovog parametra  $l^2 = 0,08 \text{ mm}^2$ . Dobiveni rezultati raspodjele posmične deformacije po visini smičnog sloja prikazani su na slikama 5 i 6.



Sl. 5 Raspodjela posmične def.,  $L = 0,2 \text{ mm}$



Sl. 6 Raspodjela posmične def.,  $L = 1 \text{ mm}$

Na temelju slika 5 i 6 očigledno je da se rezultati u potpunosti poklapaju. Time je potvrđena točnost algoritama izvedenih u radu. Osim toga, dokazana je prednost  $C^1$  homogenizacije u opisivanju nelokalnosti, gdje je pomoću Aifantisovog parametra moguće razmatrati različite vrijednosti efektivnog parametra nelokalnosti na jednom RVE-u. Za razliku, u  $C^1$ - $C^0$  pristupu za razmatranje svake nove vrijednosti parametra nelokalnosti potrebno je modelirati novi RVE različite veličine.

## 4 ZAKLJUČAK

U radu je izveden novi postupak višerazinske analize uz primjenu računalne homogenizacije drugog reda, pri čemu se na mikrorazini primjenjuje Aifantisova teorija gradijentne elastičnosti ( $C^1$ - $C^1$  homogenizacija). Pokazana je konzistentnost dobivenih izraza u usporedbi s homogenizacijom u kojoj se na mikrorazini koristi teorija lokalnog kontinuuma ( $C^1$ - $C^0$  homogenizacija). Izvedeni su gradijentni poopćeni rubni uvjeti periodičnosti i pomaka. Pošto se u  $C^1$ - $C^1$  homogenizaciji na mikrorazini javljaju veličina RVE-a i Aifantisov mikrostrukturni parametar kao mjere nelokalnosti, izvedena je veza između njih koja daje „efektivni“ parametar nelokalnosti. Novoizvedeni postupak je verificiran na problemu smičnog sloja, pri čemu su rezultati uspoređeni s rezultatima dobivenim  $C^1$ - $C^0$  pristupom.

## Zahvala

Istraživanje je u potpunosti financirano od Hrvatske zaklade za znanost u okviru projekta Multiscale Numerical Modeling of Material Deformation Responses from Macro- to Nanolevel (2516) - MNumMacroNano.

## Literatura:

- [1] ABAQUS/Standard 6.14-1, Dassault Systemes
- [2] Gitman, I. M., Askes, H., Aifantis, E. C., "The Representative Volume Size in Static and Dynamic Micro-Macro Transitions", International Journal of Fracture, **135**, 1-4, 2005, L3-L9.
- [3] Kouznetsova, V. G., Geers, M. G. D., Brekelmans, W. A. M., "Multi-scale second-order computational homogenization of multi-phase materials: a nested finite element solution strategy", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **193**, 2004, 5525-5550.
- [4] Lesičar, T., Tonković, Z., Sorić, J., "C1 Continuity Finite Element Formulation in Second-Order Computational Homogenization Scheme", Journal of Multiscale Modelling, **04**, 04, 2012, 1250013.
- [5] Lesičar, T., Tonković, Z., Sorić, J., "Second-Order Computational Homogenization Approach Using Higher-Order Gradients at Microlevel", Key Engineering Materials, **665**, 2016, 181-184.
- [6] Lesičar, T., Tonković, Z., Sorić, J., "A second-order two-scale homogenization procedure using C1 macrolevel discretization", Computational Mechanics, **54**, 2, 2014, 425-441.

## Autori:

Tomislav Lesičar, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zavod za tehničku mehaniku, Ivana Lučića 5, 10000 Zagreb, tel. 01/6168-178, fax. 01/6168-187, e-mail: [tomislav.lesicar@fsb.hr](mailto:tomislav.lesicar@fsb.hr), web: <http://www.fsb.hr/lnm/staff/>  
Zdenko Tonković, tel. 01/6168-450, e-mail: [zdenko.tonkovic@fsb.hr](mailto:zdenko.tonkovic@fsb.hr)  
Jurica Sorić, tel. 01/6168-103, e-mail: [jurica.soric@fsb.hr](mailto:jurica.soric@fsb.hr)